

Расчёт электронного строения поверхности построенной модели германен выполнен с помощью неограниченного метода Хартри-Фока в базе атомных орбиталей STO-3G. Основные электронно-энергетические характеристики германена (длины межатомных связей Ge-X $R(\text{Ge-X})$; энергии верхней занятой $E_{\text{ВЗМО}}$ и нижней вакантной $E_{\text{НВМО}}$ молекулярных орбиталей; малликовские заряды на дефектах X и ближайшем атоме Ge), как идеального, так и с точечными дефектами представлены в таблице.

Структура Ge-n+X	$R(\text{Ge-X}), \text{\AA}$	$E_{\text{ВЗМО}}, \text{эВ}$ (α / β)	$E_{\text{НВМО}}, \text{эВ}$ (α / β)	$q(\text{Ge}) / q(\text{X})$
Ge-6	-	-1.08 / -1.08	-0.81 / -0.81	0.03 / -
Ge-6+Si	2.1	-0.01 / -0.01	0.03 / 0.03	-0.07 / 0.23
Ge-6+Sn	2.1	-0.01 / -0.01	0.04 / 0.04	-0.08 / 0.22
Ge-6+P	2.1	-0.1 / -0.07	0.16 / 0.14	0.03 / -0.08
Ge-6+As	2.3	-0.10 / -0.06	0.16 / 0.14	0.07 / -0.22
Ge-6+Sb	2.1	-0.08 / -0.08	0.14 / 0.16	0.02 / -0.12
Ge-6+Al	2.3	-0.10 / -0.12	0.15 / 0.14	-0.20 / 0.70
Ge-6+Ga	2.1	-0.07 / -0.08	0.004 / 0.03	0.06 / -0.39
Ge-6+In	2.1	-0.1 / -0.12	0.12 / 0.14	-0.10 / 0.36

Как следует из результатов, представленных в таблице, точечные дефекты сильно изменяют электронное строение фрагмента германена. Энергии $E_{\text{ВЗМО}}$ и $E_{\text{НВМО}}$ сильно возрастают по сравнению с бездефектной структурой, однако разница между энергиями (эффективная запрещенная щель) изменяется мало. Это означает, что свойства двумерной поверхности существенно не изменяются. Скорее всего, увеличение концентрации дефектов может привести к значимым вариациям энергетической щели и, следовательно, изменению физических свойств данной структуры.

Список публикаций:

- [1] Acun A., Zhang L., Bampoulis P., Farmanbar M., Van Houselt A., Rudenko A.N., Lingenfelder M., Brocks G., Poelsema B., Katsnelson M.I., Zandvliet H.J.W. // *Germanene the germanium analogue of graphene* // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2015. V.27. 443002 (11pp).
- [2] Степанов Н.Ф. // *Квантовая механика и квантовая химия*. М.: Мир, 2001.
- [3] Лебедев Н. Г. // *Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов: учебное пособие*. В 3 частях. Часть 1. Метод Хартри-Фока. Волгоград: Издательство ВолГУ, 2010. 116 с.
- [4] Лебедев Н. Г., Литинский А.О. // *Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов: учебное пособие*. В 3 частях. Часть 2. Кластерные модели твердых тел. Волгоград: Издательство ВолГУ, 2010. 108 с.

Дилатометрические исследования процесса термостабилизации полиакрилонитрильного волокна

¹Иргалина Регина Ильфатовна

¹Фазлитдинова Альфия Габдиловна, ¹Тюменцев Василий Александрович

¹Челябинский государственный университет

Фазлитдинова Альфия Габдиловна

mariya-fks@mail.ru

Одним из основных видов армирующих элементов, который применяется при создании композиционных материалов, являются углеродные волокна (УВ). Основные сферы использования УВ считается авиакосмическая промышленность, автомобилестроение, кораблестроение и энергетика. Углеволокнистые материалы можно получить с помощью специально разработанных технологических процессов. И в качестве первичного исходного сырья используются различные полимерные волокна, чаще всего полиакрилонитрильные (ПАН).

Существующая технология производства УВ проводится, как правило, в трех последовательных стадий термообработки исходного волокна: термостабилизации, карбонизации и графитации. После стадии термостабилизации нити полимерного волокна приобретают структуру, которая необходима для получения требуемого качества УВ и приводит к образованию поперечных химических связей между макромолекулами полимера. На этапе карбонизации они приобретают достаточно высокую прочность и на 80-95% состоят из элементарного углерода, а после графитации получают конечный продукт - графитизированное углеродное волокно с кристаллической структурой. Стадия термостабилизации является наиболее продолжительной по времени, а также энергоемкой.

В работе рассмотрено влияние режимов термомеханической обработки (ТМО) на закономерности структурных и химических превращений материала ПАН нитей, изготовленных с применением диметилформамида, в процессе термостабилизации. Проведена серия экспериментов с предварительной изотермической обработкой при 220°C в течение 10 минут. Дальнейшая термостабилизация осуществлялась при 265°C. Термообработка проводилась в атмосфере воздуха при постоянной вытягивающей нагрузке 0,6 г/текс. Дилатометрические исследования проводились путем фиксации изменения линейных размеров (l/l_0) ПАН нити в процессе термообработки

Во время изотермической обработки ПАН волокна в атмосфере воздуха наблюдается первоначально пластическое течение материала, которое сменяется усадкой, обусловленной протеканием реакций дегидрогенизации, циклизации и окисления (рис.1). Этот процесс сопровождается структурными изменениями материала. Первоначально наблюдается совершенствование структуры ПАН нити (увеличение размеров областей когерентного рассеяния (ОКР) и повышение текстуры материала). При этом происходит наиболее активный рост размеров ОКР, ориентированных параллельно оси нити. Дополнительная предварительная термообработка стимулируют повышение текстурированности материала на начальном этапе термостабилизации, обуславливают существенное уменьшение времени, в течение которого развивается процесс диспергирования ОКР и образования новой высокодисперсной фазы [1, 2].

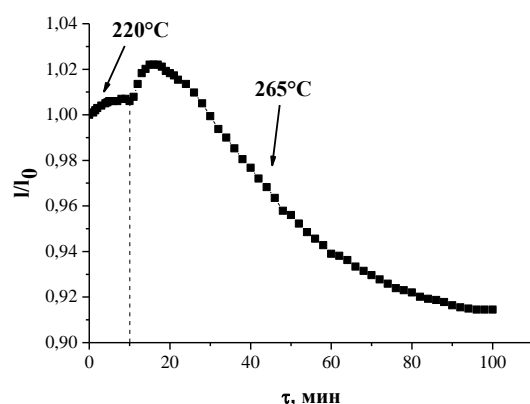


рис.1. Кинетическая кривая изменения линейных размеров ПАН нити в процессе двухстадийной термообработки

Список публикаций:

- [1] Fazlitdinova A.G., Tyumentsev V.A., Podkopayev S.A., Shveikin G.P. // J Mater Sci 2010. V.45, P.3998.
 [2] Fazlitdinova A.G., Tyumentsev V.A. // Russian J App Phys 2015. V.60 (11), P.1705

Влияние вида анизотропии межфазной энергии на скорость цилиндрических включений, мигрирующих в кристалле

Карпенко Анастасия Сергеевна

Южный федеральный университет

Гармашов Сергей Иванович, к.ф.-м.н.

as.karpenko911@yandex.ru

Термомиграция – явление миграции жидкого включения в кристалле под действием градиента температуры; применяется для создания глубоких р-п переходов, а также как метод исследования процессов кристаллизации и растворения [1]. Жидкое включение может быть плоским, цилиндрическим или же иметь форму капли. При выполнении настоящей работы основное внимание уделялось анализу миграции жидких цилиндрических включений. Форма их поперечного сечения и скорость зависят от межфазной кинетики и анизотропии межфазной энергии (АМЭ), поэтому представляется актуальным разработка математической модели мигрирующего цилиндрического включения, которая может в будущем послужить основой для создания методики определения некоторых физических параметров (например, параметров межфазной кинетики и АМЭ) из экспериментальных данных.

Для решения задачи о форме сечения и скорости цилиндрического включения использовался метод граней: аппроксимация межфазной границы (в том числе её криволинейных участков) набором плоских граней с небольшим углом β между ними ($\beta = 2\pi/N$, N – количество граней) [2]. Достоинством этого метода является отсутствие ограничений на вид анизотропии межфазной кинетики и межфазной энергии. Последняя в общем